Universidade Federal de São João Del-Rei-UFSJ
Departamento de Física e Matemática -DEFIM- *Campus* Alto Paraopeba

Relatório de Iniciação Científica

# Difusão Anômala modelada via Equação de Difusão Fracionária

**Aluno:** Walinton Evangelista de Sousa (Engenharia Civil)
**Orientador:** Prof. Dr. José Eloy Ottonni (DEFIM)

Ouro Branco, Março de 2018.

# Resumo

No presente trabalho faz-se uma abordagem da aplicação do Cálculo Fracionário na modelagem de sistemas físicos complexos. Começando pelo processo de difusão de soluções e terminando com a modelagem do processo de difusão de neutrons em reatores nucleares. Para isto, necessita-se fazer uma abordagem histórica e conceitual do Cálculo de Ordem Fracionária, assunto que requer certo grau de domínio conceitual específico e refino matemático. Para estudo inicial deste, se faz necessário o entendimento de algumas funções especiais, sendo elas: Gama, Beta , Mittag-Leffler, Função R e Função F. Dentro do Cálculo Fracionário existem diversas formulações, neste texto serão estudadas as de Caputo, e Riemann-Liouville, sendo essas as mais conhecidas e utilizadas. Dentro dessas formulações será feita a diferenciação entre integral e derivada fracionária para facilitar o estudo.



**Palavras chave**: Cálculo Fracionário, difusão anômala, neutrons, difusão de neutrons, Reatores nucleares, Gama, Beta, Mittag-Leffler, Caputo, , Riemann-Liouville.



# Abstract

In the present work an approach is applied to the application of the Fractional Calculus in the modeling of complex physical systems. Starting with the process of diffusion of solutions and ending with the modeling of the process of diffusion of neutrons in nuclear reactors. For this, it is necessary to make a historical and conceptual approach of the Fractional Order Calculus, subject that requires certain degree of specific conceptual domain and mathematical refinement. For the initial study of this, it is necessary to understand some special functions, being: Gamma, Beta, Mittag-Leffler, Function R and Function F. Within the Fractional Calculus there are several formulations, in this text will be studied those of Caputo, and Riemann -Liouville, these being the most known and used. Within these formulations will be made the differentiation between integral and fractional derivative to facilitate the study.



**Key words**: Fractional Calculus, Anomalous Diffusion, Neutrons, Neutron Diffusion, Nuclear Reactors, Gamma, Beta, Mittag-Leffler, Caputo,, Riemann-Liouville.

# Agradecimentos

Em primeiro lugar, quero agradecer ao meu grande amigo e orientador *Prof. Dr. José Eloy Otonni* pela oportunidade, incentivo, paciência, boa vontade e ensinamentos. Exemplo de pessoa, caráter, retidão, bom senso e humanidade. O qual tenho como espelho.

Ao meu grande amigo *Prof. Dr. Roque Teles Frade Paulinelli* pela incentivo, amizade, apoio, boa vontade e ensinamentos.

Ao meu grande amigo *Matheus Dias Carvalho*, pelo companherismo e pelas valorosas contribuições que tem feito pela matemática.

Ao meu grande amigo o *Engº Roberto V. Duque Valentim* da Central Nuclear Almirante Álvaro Alberto – CNAAA-Eletronuclear- pela oportunidade, ensinamentos e pelo exemplo de pessoa de bom coração que é. E a todos os meus amigos dessa empresa, que de forma direta ou indireta foram inspiração para esse trabalho.

# Dedicatória

Dedico este trabalho à minha família, ao Prof. José Eloy Otonni e ao Engº Roberto V. Duque Valentim.

Dedico também ao meu amigo José Wirke Salvador Lopes *(in memoriam)* a quem eternizo nessa homenagem.

Dedico também, em especial, aos físicos Stephen William Hawking e Richard Philips Feynman *(in memoriam)* a quem tenho como ídolos e que sem os quais a humanidade não haveria progredido como progrediu.

# Capítulo 1

# Introdução

## 1.1 Difusão

A difusão pode ser definida como o movimento randômico de partículas de regiões de maiores concentrações para regiões de menores concentrações de maneira a diminuir o gradiente de concentração de partículas no meio.

## 1.2 Contexto Histórico

As primeiras medidas sistemáticas de um processo de difusão foram feitas pelo químico escocês Thomas Graham (1805-1869), que estudou difusão de gases e líquidos entre 1828 e 1850. Por exemplo, para estudar a difusão de substâncias na água, Graham encheu dois reservatórios com diferentes concentrações de ácidos ou sais em água, permitiu que os conteúdos dos dois reservatórios se comunicassem por vários dias, e então analisou as respectivas concentrações.

Graham observou que a quantidade de soluto transportada decrescia em função do tempo e que a quantidade de soluto que se difundia durante um período fixo de tempo de um reci-piente cheio para um recipiente vazio era proporcional à quantidade de soluto inicialmente presente.

Em 1855, o médico e fisiologista alemão Adolf Fick (1829-1901), então professor associado de anatomia e fisiologia da Universidade de Zurique, propôs leis fenomenológicas para a difusão de um soluto em um solvente (que atualmente levam o seu nome) análogas aos modelos de Fourier para a condução de calor e de Ohm para a condução de eletricidade (mostrando que um tipo de processo pode ser comum a vários sistemas físicos).[1]

## 1.3 DIFUSÃO EM ESTADO ESTACIONÁRIO

O fluxo de partículas $\phi(x,t)$ é número líquido de moles de partículas cruzando uma área unitária perpendicular ao eixo x, localizada em x, por unidade de tempo, no instante t. As unidades de $\phi(x,t)$ são $mol/(cm^2.s)$.

Em três dimensões, o fluxo é definido como o número líquido de moles de partículas que cruza uma superfície de área unitária em uma unidade de tempo. Portanto, o fluxo é um vetor (isto é, ele tem componentes nas direções x, y e z). Em uma dimensão, o fluxo reduz-se a um escalar.

Quando o fluxo $\phi(x,t)$ não varia com o tempo (a concentração C também não varia com o tempo) e temos a DIFUSÃO EM ESTADO ESTACIONÁRIO (ou DIFUSÃO EM REGIME PERMANENTE).

Para que fluxo ($\phi(x,t)$) não varie com o tempo é necessário que $\phi(x,t)$ também não varie com a posição. Assim,

$$\phi(x,t) = cte. \longrightarrow D\frac{\partial C}{\partial x} = cte. \longrightarrow C(x) = ax + b, \qquad a > 0 \tag{1.1}$$

### 1.3.1 A Primeira Lei de Fick

Com base no estudo sobre o fluxo de calor entre dois corpos a temperaturas diferentes, Fick propôs que o fluxo por difusão $\phi(x,t)$, do soluto S é proporcional ao gradiente de concentração entre os dois lados da membrana semipermeável. Em que defini-se como membrana semipermeável aquelas membranas que deixam difundir apenas o solvente, impedindo a difusão do soluto. A imagem 1.1, abaixo, ilustra a situação formulada.

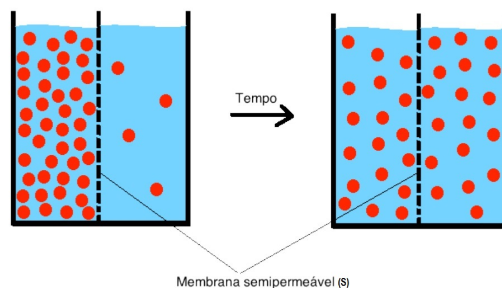



Figura 1.1: Fluxo de particulas através de uma membrana semipermeável[1]

O fluxo por difusão é expresso na equação (1.1), na qual C(x,t) é concentração em função da posição(x) e do tempo (t), D é a constante de difusão, x é variável que representa o fluxo em uma dimensão e t representa o tempo :

$$\phi(x,t) = -D\frac{\partial C}{\partial x}, \tag{1.2}$$

O sinal negativo na equação acima indica que o fluxo ocorre no sentido contrário ao do gradiente de concentração, isto é, no sentido do meio de maior concentrações para o de menor concentrações.

Contudo, é importante lembrar, que a Lei de Fick é apenas uma das muitas formas da equação do transporte. A figura 1.2, abaixo, apresenta as principais variações da equação de transporte:

Various forms of the transport equation.

| Substance flowing | Equation | Units of $j$ | Units of the constant |
|---|---|---|---|
| Particles | $j_s = -D\frac{\partial C}{\partial x}$ | $m^{-2}\ s^{-1}$ | $m^2\ s^{-1}$ |
| Mass | $j_m = -D\frac{\partial C}{\partial x}$ | $kg\ m^{-2}\ s^{-1}$ | $m^2\ s^{-1}$ |
| Heat | $j_H = -\kappa\frac{\partial T}{\partial x}$ | $J\ m^{-2}\ s^{-1}$ or $kg\ s^{-3}$ | $J\ K^{-1}\ m^{-1}\ s^{-1}$ |
| Electric charge | $j_e = -\sigma\frac{\partial V}{\partial x}$ | $C\ m^{-2}\ s^{-1}$ | $C\ m^{-1}\ s^{-1}\ V^{-1}$ or $\Omega^{-1}\ m^{-1}$ |
| Viscosity ($y$ component of momentum transported in the $x$ direction) | $\frac{F}{S} = -\eta\frac{\partial v_y}{\partial x}$ | $N\ m^{-2}$ or $kg\ m^{-1}\ s^{-2}$ | $kg\ m^{-1}\ s^{-1}$ or Pa s |

Figura 1.2: Equações de transporte [2]

A equação diferencial do processo de difusão implica que as partículas obedecem a derivada de ordem um em relação ao tempo. Os processos que fogem dessa relação são conhecidos como anômalos, esse conjunto de processos difusivos anômalos é dividido em dois: processos subdifusivos e superdifusivos, que serão abordados a frente com maior profundidade.[2]

## 1.4 DIFUSÃO EM ESTADO NÃO-ESTACIONÁRIO

Em sua maior parte, as situações práticas, envolvendo difusão ocorrem em condições de ESTADO NÃO-ESTACIONÁRIO (ou REGIME TRANSITÓRIO ou CONDIÇÕES TRANSIENTES).

No processo de difusão em estado não-estacionário, tanto o fluxo de difusão, quanto o gradiente de concentração, numa dada posição x, variam com o tempo t. Como consequência, ocorre um ajuntamento ou esgotamento líquido do componente que se encontra em difusão.

### 1.4.1 A relação de Einstein entre Difusão e Viscosidade

Einstein adotou desde cedo uma visão realista, objetiva, sobre a existência de átomos e moléculas. Na sua tese de doutoramento Einstein analisa o fenômeno de difusão das partículas do soluto numa solução diluída (moléculas de açúcar em água) com o objetivo de obter estimativas para o número de Avogadro e o diâmetro das partículas do soluto. As propriedades termodinâmicas das soluções diluídas já tinham sido suficientemente estabelecidas. Sabia-se, por exemplo, que a pressão osmótica, exercida pela solução sobre uma membrana semi-permeável, impedindo a passagem do soluto, comporta-se de acordo com a lei dos gases perfeitos. Na parte inicial da tese, Einstein faz um cálculo hidrodinâmico, com base nas equações de Navier-Stokes para o escoamento de um fluido incompressível, a fim de obter a viscosidade efetiva do fluido na presença do soluto. No modelo adotado, as moléculas do soluto são esferas rígidas, não interagentes, e bem maiores do que as moléculas do solvente. O resultado final, que ainda tem um pequeno erro e precisou ser corrigido alguns anos depois por um aluno de Einstein, é dado por[4]

$$\eta^* = \eta(1 + \Phi) \tag{1.3}$$

onde $\eta*$ é a viscosidade efetiva, $\eta$ é a viscosidade do solvente puro, e $\Phi$ é a fração do volume total ocupado pelas partículas do soluto. Supondo que o soluto seja constituído por partículas esféricas de raio a, a fração de volume é dada por,

$$\Phi = \frac{4}{3V}\pi a^3 N_s \tag{1.4}$$

onde Ns é o número de moléculas do soluto e V é o volume total da solução. Utilizando a densidade de massa, $\rho$, e a massa molar do soluto, m, que são grandezas experimentalmente acessíveis, temos

$$N_s = \frac{\rho V}{m} N_A \tag{1.5}$$

onde $N_A$ é o número de Avogadro. A partir dessas expressões, podemos escrever a relação

$$\frac{4}{3V}\pi a^3 N_s = \frac{\eta^*}{\eta} - 1 \tag{1.6}$$

Já que as viscosidades podem ser medidas, que a densidade de massa e a massa molar do soluto são conhecidas, aparecem como incógnitas o raio a das partículas do soluto e o número de Avogadro $N_A$. Na parte final da tese, Einstein recorre a um argumento engenhoso, deduzido de forma alternativa no artigo sobre o movimento browniano, a fim de obter uma segunda relação entre $a$ e $N_A$. Vamos discutir esse argumento de Einstein. A idéia engenhosa consiste em considerar uma força $K$ (na direção do eixo x) atuando sobre as partículas grandes da solução (as moléculas de açúcar são muito maiores do que as moléculas de água), contidas em um volume elementar de comprimento $\Delta x$ e seção transversal $\Delta s$. Para esferas rígidas de raio $a$ e velocidade $v$, mergulhadas num fluido com viscosidade $\eta$, essa força deve ser dada pela lei (de atrito viscoso) de Stokes,

$$K = 6\pi a\eta v \tag{1.7}$$

de acordo com o texto de mecânica de Kirchhoff, que Einstein estudou durante os seus anos de formação em Zurique (e que é a única referência citada no primeiro trabalho sobre a teoria do movimento browniano!) Mas as partículas se difundem pelo fluido devido ao gradiente de pressão. Então, nesse volume elementar, estariam sujeitas a uma força por unidade de volume, ao longo do mesmo eixo $x$, dada por

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{P(x+\Delta x) - P(x)}{\Delta x} \tag{1.8}$$

Podemos agora escrever uma equação de balanço entre essas duas forças,

$$K = -\frac{m}{\rho N_A}\frac{\partial P}{\partial x} = 6\pi a\eta v \tag{1.9}$$

onde $\rho$ é a densidade de massa e $m$ é a massa molar do soluto. Obtemos assim uma expressão para a velocidade $v$ das partículas, que nos remete ao fluxo $\phi$ ao longo do eixo $x$ (quantidade de massa das partículas atravessando a seção de área $\Delta S$ durante o intervalo de tempo $\Delta t$),

$$\Phi = \rho v = -\frac{m}{\rho N_A}\frac{\partial P}{\partial x} = 6\pi a\eta v \tag{1.10}$$

Pela equação geral dos gases ideais para pressão osmótica, sabendo que $\frac{\rho}{m} = \frac{n}{V}$, temos

$$PV = nRT \Longrightarrow P = \frac{RT\rho}{m} \tag{1.11}$$

que Einstein justificava através de argumentos de física estatística para um sistema de partículas não interagentes, temos

$$\Phi = \rho v = -\frac{m}{\rho N_A}\frac{\partial P}{\partial x} = 6\pi a\eta v = -D\frac{\partial P}{\partial x} \tag{1.12}$$

de onde vem

$$D = \frac{RT}{6\pi\eta a N_A} \tag{1.13}$$

que é uma das expressões conhecidas de Einstein, relacionando o coeficiente de difusão D, experimentalmente acessível, com a temperatura e a viscosidade do fluido.[4]

### 1.4.2 A segunda Lei de Fick

Para modelar o fenômeno da difusão em estado não-estacionário, é utilizada a equação diferencial parcial (EDP)

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial C(x,t)}{\partial x}\right) \tag{1.14}$$

conhecida por Segunda lei de Fick

Se o coeficiente de difusão não depende da composição (portanto, da posição), a segunda lei de Fick se simplifica para

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} \tag{1.15}$$

Principais condições para aplicação da segunda Lei de Fick

Para o caso hipotético, em que esteja sendo estudado, um certo volume de uma substância de concetração tal, que atenda as condições abaixo:

1. O perfil de concentração muda com o tempo: o gradiente de concentração não é constante no interior do volume considerado.

2. Quando: $\phi(x,t)_{Entrada} > \phi(x,t)_{Saida}$ há acúmulo da espécie difundida no volume considerado.

## 1.5 O Cálculo Fracionário

### 1.5.1 Histórico

Atualmente, tem se observado um grande interesse, por parte da comunidade acadêmica dos cientistas e engenheiros, pela modelagem matemática de fenômenos com o chamado Cálculo de Ordem não Inteira ou popularmente conhecido como Cálculo Fracional ou Cálculo Fracionário (CF).

Para muitos estudiosos o (CF) nasceu na troca de carta datada de 30 de setembro de 1695, entre o Marquês de L'Hôpital( 1661-1704) e Leibniz (1646-1716) na qual o assunto derivada foi considerado de forma bastante interessante, a saber: Leibniz formulou uma questão envolvendo uma possível generalização da derivada de ordem inteira para uma ordem, em princípio, arbitrária. L'Hôpital devolveu a pergunta para Leibniz, questionando-o no caso particular em que a ordem da derivada (equação 1.16) fosse meio ($n = \frac{1}{2}$).

$$\frac{d^n f(x)}{dx^n} \tag{1.16}$$

Em uma audaciosa e profética resposta, Leibniz apresenta o resultado e afirma: isto é, aparentemente, um paradoxo que um dia vai gerar várias consequências importantes.[5]

### 1.5.2 Funções Especiais

### A Função Gama

A Função Gama, ou função de Euler do Segundo Espécie, é uma extensão do significado do fatorial de um número natural para o fatorial de um número fracionário, real, ou mesmo complexo.

Para melhor conhecer suas propriedades, vamos defini-la por três formas diferentes:

**Primeira definição - Através do limite infinito (Euler):**

$$\Gamma(z) = \lim_{n\to\infty} \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 ... n}{z(z+1)(z+2)...(z+n)} n^z \ , \qquad z \neq 0, -1, -2, -3... \tag{1.17}$$

**Segunda definição - Através da integral definida (também devida a Euler):**

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty e^{-t} t^{z-1} \, dt \ , \qquad \Re(z) > 0 \tag{1.18}$$

**Propriedades**

$$\Gamma(n+1) = n!. \tag{1.19}$$

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \tag{1.20}$$

## Função Beta

A função Beta ou função de Euler de Primeira Espécie apresenta significativa relevância no Cálculo Fracionário. A definição na forma integral é:

$$\beta(p,q) = \int_0^1 t^{p-1}(1-t)^{q-1}dt, \qquad \Re(p) > 0, \Re(q) > 0. \tag{1.21}$$

Agora a forma trigonométrica, obtida quando se substitui a variável de integração $t$ por $cos^2\theta$ na equação 2.17, que será muito útil em demonstrações posteriores.

$$\beta(p,q) = 2\int_0^{\frac{\pi}{2}} cos^{2p-1}\theta sen^{2q-1}\theta d\theta, \qquad \Re(p) > 0, \Re(q) > 0. \tag{1.22}$$

Também se conhece a forma racional quando se substitui a variável de integração t por $\frac{u}{1+u}$ na equação 2.17:

$$\beta(p,q) = \int_0^{\infty} \frac{u^{p-1}}{(1+u)^{p+q}}du, \qquad \Re(p) > 0, \Re(q) > 0. \tag{1.23}$$

Outra forma importante é a generalização da função Beta, em que o limite superior passa a ser um número arbitrário $a$, pode-se obtê-la a partir da subtituição da variável de integração t por $\frac{y}{a}$:

$$\beta(p,q) = \frac{1}{a^{p+q-1}}\int_0^a y^{p-1}(a-y)^{q-1}dy, \qquad \Re(p) > 0, \Re(q) > 0. \tag{1.24}$$

A função Beta possui determinada relação com a função Gama:

$$\beta(p,q) = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)}. \tag{1.25}$$

### 1.5.3 A Integral Fracionária

Como demonstrado na introdução, a conceituação sobre integrais e derivadas de ordem fracionária foi uma consequência natural dessas com ordem inteira. Indagações a respeito, por exemplo, da derivada de ordem meia de uma função, estimularam o estudo do cálculo fracionário.

A comum formulação para a integral fracionária pode ser obtida diretamente através de repetidas integrações de uma função. Esta aproximação é conhecida como abordagem de Riemann- Liouville. Abaixo se verifica a fórmula para $n$-integrações de uma função $f(t)$.

$$\int_{t_{n-1}}^{t} \cdots \int_{0}^{t_1} f(\tau)d\tau = \frac{1}{(n-1)!}\int_{0}^{t}(t-\tau)^{n-1}f(\tau)d\tau \tag{1.26}$$

A fim de abreviar a fórmula, é introduzido o operador $J^n$ como em:

$$J^n f(t) = \frac{1}{(n-1)!}\int_{0}^{t}(t-\tau)^{n-1}f(\tau)d\tau \tag{1.27}$$

O operador $J^n$ pode ser trocado por $D^{-n}$, mas é preferível usar o primeiro de modo a evitar possíveis conflitos, uma vez que se usa o operador $D^n$ nas derivadas fracionárias.

A equação (1.23)'e limitada, pois $n$ se restringe a ser um inteiro. A principal limitação se dá na utilização do fatorial, que não tem significado para valores não-inteiros. Tentando estender a aplicabilidade desta equação, lança-se mão da função gama no lugar do fatorial. Assim, é possível generalizar para todo $\alpha\epsilon R_+$,

$$J^n f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)}\int_{0}^{t}(t-\tau)^{n-1}f(\tau)d\tau \tag{1.28}$$

#### Propriedades

Algumas propriedades são observadas nas integrais fracionárias. Em primeiro lugar, considera-se que a integração de ordem $\alpha = 0$ é o operador identidade.

$$Df(t) = f(t) \tag{1.29}$$

Uma segunda propriedade, baseada na definição natural de integral e no princípio do qual ela veio ($Cauchy$), é possível dizer que:

$$nJ^m = J^{n+m} = J^m J^n, \quad m \quad e \quad n \in R. \tag{1.30}$$

então,

$$J^\alpha J^\beta = J^{\alpha+\beta} = J^\beta J^\alpha, \quad \alpha e \beta \in R. \tag{1.31}$$

A linearidade também é uma das características dessas integrais fracionárias.

$$J^{\alpha}[af_1(t) + bf_2(t)] = aJ^{\alpha}f_1(t) + bJ^{\alpha}f_2(t) \tag{1.32}$$

Uma propriedade adicional aparece após a introdução da função $\Phi_{\alpha}$.

$$\Phi_{\alpha} = \frac{t^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} \Rightarrow \Phi_{\alpha}(t) * f(t) = \int_0^t \frac{(t-\tau)^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} f(\tau)d\tau \tag{1.33}$$

Assim, tem-se:

$$J^{\alpha}f(t) = \Phi_{\alpha}(t) * f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t-\tau)^{\alpha-1} f(\tau)d\tau \tag{1.34}$$

Nota-se através da equação anterior que a integral fracionária pode ser expressa como a convolução de dois termos, $\Phi_{\alpha}$ e $f(t)$. A partir da seguinte transformada de Laplace:

$$\mathcal{L}\{t^{\alpha}\} = \frac{\Gamma(\alpha+1)}{s^{\alpha+1}} \ , \qquad s, \alpha > 0 \tag{1.35}$$

é possível obter que:

$$\mathcal{L}\{t^{\alpha-1}\} = \frac{\Gamma(\alpha)}{s^{\alpha}} \tag{1.36}$$

e também:

$$\mathcal{L}\{\Phi(t)\} = \frac{1}{s^{\alpha}} \tag{1.37}$$

### 1.5.4 A Derivada Fracionária

A partir da formulação de Riemann-Liouville para a integração de ordem arbitrária, pode- se estabelecer uma definição para a *derivação* de ordem fracionária. A denominada derivada de ordem fracionária de Riemann-Liouville está relacionada à operação inversa da integração:

$$D^{\alpha}f(t) = D^{m}[J^{\nu}f(t)] \ , \qquad t > 0 \tag{1.38}$$

Assim,

$$D^{\alpha}f(t) = \begin{cases} \frac{d^m}{dt^m}\left[\frac{1}{\Gamma(m-\alpha)}\int_0^t \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha+1-m}}d\tau\right] \ , & m-1 < \alpha < m \\ \frac{d^m}{dt^m}f(t) \ , & \alpha = m \end{cases} \tag{1.39}$$

A explicação do procedimento é simples. Tendo encontrado o inteiro m, em que $m-1<\alpha<m$, o primeiro passo é integrar a função $f(t)$ por ordem $m-\alpha$ e, em seguida, diferenciar a função resultante $f(t)$ pela ordem m. Desta maneira, obtendo-se uma diferenciação de ordem resultante $\alpha$. A equação (17) estabelece a definição de $D^{\alpha}f(t)$ e é conhecida como definição do lado esquerdo: *LHD-Left Hand Definition*.

Existe uma segunda definição que é conhecida como definição do lado direito. Esta usa as mesmas operações que a anterior, porém em ordem inversa. A *RHD-Right Hand Definition* é dada por:

$$D_{*}^{\alpha}f(t)=\frac{1}{\Gamma(m-\alpha)}\int_{0}^{t}\frac{f^{m}(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha+1-m}}d\tau, m-1<\alpha<m \tag{1.40}$$

$$\frac{d^{m}}{dt^{m}}f(t), \alpha=m \tag{1.41}$$

Esta última, apesar de ser referida aqui como *RHD*, foi originalmente formulada por Caputo, e é por isso, comumente conhecida como *derivação fracionária de Caputo*.

### 1.5.5 Caputo x Riemann-Liouville

Inicialmente, foi suposto uma função $f(t)$ na qual foi aplicada a derivada fracionária de ordem $\alpha$, seguindo as duas definições anteriores: $D^{\alpha}(t)$ e $D_{*}^{\alpha}(t)$. Estas definições segundo Riemann-Liouville e Caputo, respectivamente, só serão equivalentes se $f(t)$ for uma função causal, isto é, é nula para $t\leq 0$.

Outro aspecto que deve ser observado é que embora para polinômios não-constantes as definições segundo Riemman-Liouville e Caputo coincidam, isto não ocorre para constantes, uma vez que na definição de Caputo primeiramente toma-se a derivada de ordem inteira e depois a integral fracionária. A derivada de ordem fracionária de uma constante segundo Caputo é *nula*, ou seja: $D_{*}^{\alpha}1=0$, o que não ocorre quando se calcula a derivada a partir de Riemann-Liouville. Esta última fornece:

$$D^{\alpha}c=\frac{ct^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} \tag{1.42}$$

Considerando a metodologia da transformada de Laplace nas duas definições, é possível fazer algumas observações.

Riemann-Liouville:

$$\mathcal{L}\{D^{\alpha}f(t)\} = s^{\alpha}F(s) - \sum_{k=0}^{m=1} s^{k}D^{(\alpha-k-1)}f(0) \tag{1.43}$$

Caputo:

$$\mathcal{L}\{D_{*}^{\alpha}f(t)\} = s^{\alpha}F(s) - \sum_{k=0}^{m=1} s^{(\alpha-k-1)}f^{(k)}(0), \qquad \alpha \in C,\ m \in N \tag{1.44}$$

A transformada de Laplace segundo Caputo parece ser mais apropriada na resolução de equações diferencias fracionárias, pois requer o conhecimento de condições iniciais da função e suas derivadas de ordem inteira, que têm interpretações físicas.

Neste contexto, embora a definição de Riemann-Liouville para derivadas fracionárias seja mais conhecida, a formulação de Caputo tem maior aplicabilidade, mesmo sendo esta última mais restritiva.

### 1.5.6 Função de Mittag-Leffler

Juntamente com as funções anteriores definidas por Euler, a Função de Mittag-Leffler (na verdade, toda uma *classe* de funções), é de presença ubíqua no CF. A Função de Mittag-Leffler trata-se de uma generalização da exponencial, e tem um papel equivalente na resolução de Equações Diferenciais Fracionárias lineares ao que a função exponencial tem para as Equações Diferenciais lineares de ordens inteiras. A Função de Mittag-Leffler foi introduzida primeiramente em 1903 pelo matemático sueco Magnus Gosta Mittag-Leffler, e posteriormente generalizada contendo mais parâmetros. Essa função é dependente de um parâmetro complexo $\alpha$, como se mostra na série a seguir[6]:

$$E_{\alpha}(x) = 1 + \frac{x}{\Gamma(\alpha+1)} + \frac{x^2}{\Gamma(2\alpha+1)} + \frac{x^3}{\Gamma(3\alpha+1)} + ... + \frac{x^n}{\Gamma(n\alpha+1)} + ... \tag{1.45}$$

Para o caso particular onde $\alpha = 1$, a função de Mittag-Leffler se reduz à própria exponencial.

$$E_1(x) \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\Gamma(n+1)} \;=\; e^x. \tag{1.46}$$

Essa função foi generalizada para dois parâmetros, originalmente por Agarwal da seguinte maneira:

$$E_{\alpha,\beta}(x) \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\Gamma(\alpha.n+\beta)} \qquad \Re(\alpha) > 0, \Re(\beta) > 0. \tag{1.47}$$

### 1.5.7 A Função R e a Função F

Desde 1903, a função Mittag-Leffler foi modificada para ter uma representação geral para a resolução de equações diferenciais fracionárias. Ultimamente, a tentativa de Miller e Ross (1993), Lorenzo e Hartley (1999) para generalizar ainda mais resultou em duas funções importantes: a função R e a função F, listadas abaixo[7]:

$$F_q[a,t] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n t^{(n+1)q-1}}{\Gamma(\{n+1\}q)} \tag{1.48}$$

$$\mathcal{L}\{F_q[a,t]\} = \frac{1}{s^q - a} \tag{1.49}$$

$$R_{q,v}[a,t] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n t^{(n+1)q-1-v}}{\Gamma(\{n+1\}q - v)} \tag{1.50}$$

$$\mathcal{L}\{R_{q,v}[a,t]\} = \frac{s^v}{s^q - a} \tag{1.51}$$

## 1.6 Equação da difusão anômala modelada via equação da difusão fracionária

**Difusão unidimensional em um meio finito [6]**

A difusão convencional é representada pela equação (1.51) , no caso da difusão fracionária:

$$\frac{\partial^\alpha C(x,t)}{\partial t^\alpha} = D\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}, \tag{1.52}$$

onde $C(x,t)$ representa a concentração de soluto no ponto $x$ e no tempo $t$.

Pelos estudos das equações diferenciais parciais unidimensionais, se sabe que, em geral, para a resolução destas são necessárias duas condições de contorno e uma inicial. O problema tratado aqui será referente a difusão em um meio unidimensional, assim a função desejada irá variar apenas com relação ao eixo x e com o tempo. O objeto de estudo terá comprimento total igual a L, onde sua matéria está totalmente distribuída de acordo com uma função genérica c(x) no instante inicial[6].

Como condições de contorno tem-se:

$$\left.\frac{\partial(C(x,t))}{\partial x}\right|_{x=0} = 0, \quad \left.\frac{\partial(C(x,t))}{\partial x}\right|_{x=L} = 0. \tag{1.53}$$

Essas condições de contorno mostram que o meio é fechado, portanto não há fluxo nas extremidades.

Se faz a hipótese típica do método de separação de variáveis, na qual a função desejada pode ser representada como um produto de duas funções, na qual uma depende apenas de $x$ e a outra depende apenas de $t$:

$$C(x,t) = X(x)T(t). \tag{1.54}$$

Substituindo a hipótese na equação diferencial de difusão fracionária, tem-se:

$$X(x)T^{(\alpha)}(t) \;=\; DX''(x)T(t). \tag{1.55}$$

Pelo resultado acima, pode-se perceber que o método de separação de variáveis funcionou, onde se consegue isolar o que depende da variável x de um lado e o que depende de t do outro, assim tudo isso se torna igual a uma constante, pois é a única solução possível para uma igualdade entre dois membros com variáveis independentes de modo que possa ser verdade para qualquer alteração entre estas, como se pode ver abaixo:

$$\frac{T^{(\alpha)}(t)}{DT(t)} \;=\; \frac{X''(x)}{X(x)} = -\lambda\ (constante). \tag{1.56}$$

Agora sim, o problema que era a resolução de uma EDP se torna a resolução de duas EDO's. Nesse momento tem-se três hipóteses para a constante $-\lambda$, esta pode ser negativa, positiva ou nula. Estudando o caso em que $\lambda$ é igual a zero, tem-se:

$$X''(x) = 0. \tag{1.57}$$

A solução mais geral para a X(x) nesse caso será:

$$X(x) = Bx + C,\ sendo\ B\ e\ C\ constantes\ quaisquer. \tag{1.58}$$

Utilizando a primeira condição de contorno, equação (1.53):

$$X'(0)T(t) = 0. \tag{1.59}$$

Para isso ser verdade e ser considerado solução, X'(0) tem que ser igual a 0, pois, caso T(t) seja 0, a equação da concentração será sempre nula, como pode ser facilmente verificado substituindo essa condição na equação (1.54), o que só seria solução do problema para o caso particular e trivial onde c(x) = 0, o que não interessa, pois, se procura uma solução geral. Aplicando X'(0)=0 em X(x), tem-se que[6]:

$$X'(0) = B = 0, \tag{1.60}$$

logo:

$$X(x) = C. \tag{1.61}$$

Utilizando a segunda condição de contorno:

$$X'(L)T(t) = 0. \tag{1.62}$$

Como explicado anteriormente só seria solução se X'(L) for 0, o que leva a:

$$X(L) = C. \tag{1.63}$$

Assim se chega ao resultado de que a concentração não varia com a posição, o que não é interessante.

Estudando os outros casos, $-\lambda > 0$ $e$ $-\lambda < 0$, tem-se as seguintes EDO's:

$$T^{(\alpha)}(t) = -\lambda DT(t), \tag{1.64}$$

$$X''(x) = -\lambda X(x). \tag{1.65}$$

Para os dois casos tem-se que a equação relacionada a x pode ser resolvido a partir de um palpite inicial (ansatz), este palpite será uma exponencial em razão do aparecimento constante desta função na resolução de equações diferenciais ordinárias, assim supõe-se que X(x) será do tipo $de^{rx}$, sendo $d$ e $r$ constantes. Para encontrar os valores de $r$, substitui-se o palpite na equação (1.65), obtendo:

$$r^2 de^{rx} = -\lambda de^{rx}, \; com \; d \in \Re - (0). \tag{1.66}$$

Dividindo toda equação por $de^{rx}$, que pode-se ter certeza que não será um termo nulo, tem-se:

$$r^2 = -\lambda, \tag{1.67}$$

logo:

$$r = \pm\sqrt{-\lambda}. \tag{1.68}$$

Considerando que $-\lambda > 0$, tem-se que:

$$X(x) = c_1 e^{\sqrt{-\lambda}x} + c_2 e^{-\sqrt{-\lambda}x}. \tag{1.69}$$

Substituindo a primeira condição de contorno, X'(0) = 0 utilizada anteriormente, percebe-se que só é verdade caso $d_1 = d_2$. Assim:

$$X(x) = d_1[e^{\sqrt{-\lambda}x} + e^{-\sqrt{-\lambda}x}]. \tag{1.70}$$

Com a segunda condição de contorno, X'(L) = 0, obtêm-se que há solução apenas se $d_1$ for 0, que não interessa, pois leva novamente ao caso trivial.

Agora resta o último caso, no qual $-\lambda < 0$. Para este pode-se partir da equação (1.74), na qual, fazendo o uso de números complexos:

$$X(x) \;=\; d_1 e^{i\sqrt{\lambda}x} + d_2 e^{-i\sqrt{\lambda}x}. \tag{1.71}$$

Assim, como se pode perceber, essa equação é uma soma de um seno e um cosseno.

$$X(x) \;=\; d_1 cos(\sqrt{\lambda}x) + d_2 sen(\sqrt{\lambda}x). \tag{1.72}$$

Utilizando a primeira condição de contorno X'(0) = 0, encontra-se que $d_2$ é igual a zero. Logo:

$$X(x) \;=\; d_1 cos(\sqrt{\lambda}x). \tag{1.73}$$

Utilizando a segunda condição de contorno X'(L) = 0, encontra-se que $\sqrt{\lambda}L$ deve ser múltiplo inteiro de $\pi$:

$$\lambda = \frac{n^2\pi^2}{L^2}, \quad com\ n \in \mathbb{N}. \tag{1.74}$$

Como $n$ pode ser qualquer inteiro, esse problema possui infinitas soluções, sendo que a cada uma delas se associa uma nova constante. Substituindo o $\lambda$ da equação (1.74) e considerando que n pode ser um número natural qualquer, tem-se que a função X(x) é igual a um somatório de cossenos na sua forma mais geral, pois, uma combinação linear de soluções também é solução.

$$X(x) \;= \sum_{n=0}^{\infty} d_n cos\Big(\frac{n\pi x}{L}\Big) \tag{1.75}$$

Agora que foi encontrada a função relacionada a $x$, serão feitos os cálculos para $t$ a partir da equação (1.64). Para a resolução da EDO relacionada ao tempo, aplica-se a transformada de Laplace nos dois membros, em razão de $\lambda$ e D serem constantes, estes não sofrem transformação.

$$\mathcal{L}\{T^{\alpha}(t)\} \;=\; -\lambda D \mathcal{L}\{T(t)\}. \tag{1.76}$$

Para um estudo bem genérico, será necessário neste momento a distinção entre dois processos anômalos, os subdifusivos e os superdifusivos. Os processos subdifusivos são aqueles em que a ordem da derivada varia de 0 até 1, já os superdifusivos são aqueles em que a ordem da derivada varia de 1 até 2, essa diferença promove mudanças no momento da resolução.

Quando se aplica a transformada de Laplace na parte esquerda da equação (1.64) de um processo subdifusivo, faz se necessário o uso de uma forma genérica da regra da transformada de Laplace da derivada pela formulação de Caputo. Para o caso particular, tem-se que:

$$\mathcal{L}\{T^{\alpha}(t)\} \;=\; s^{\alpha}\mathcal{L}\{T(t)\} - s^{\alpha-1}T(0). \tag{1.77}$$

Substituindo na equação (1.76) e isolando a transformada de Laplace de T(t), obtêm-se:

$$\mathcal{L}\{T(t)\} = \frac{s^{\alpha-1}T(0)}{s^{\alpha}+D\lambda}. \tag{1.78}$$

Agora aplica-se a transformada de Laplace inversa na equação anterior, mas para encontrar um resultado que pode passar por uma melhor análise será utilizado um segundo resultado expresso no apêndice deste trabalho, referente a transformada de Laplace de um caso geral da função de Mittag-Leffler. Fazendo uso deste, obtêm-se que:

$$T(t) = T(0)E_{\alpha,1}(-D\lambda t^{\alpha}). \tag{1.79}$$

Substituindo o valor de $\lambda$ e considerando $n$ qualquer número natural, pode-se escrever a solução anterior como uma combinação linear de soluções:

$$T(t) = f_n E_{\alpha,1}\left(\frac{-Dn^2\pi^2t^{\alpha}}{L^2}\right). \tag{1.80}$$

Assim se obtêm a solução geral do problema fazendo a união da solução X(x) e T(t):

$$C(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n cos\Big(\frac{n\pi x}{L}\Big)E_{\alpha,1}\left(\frac{-Dn^2\pi^2t^{\alpha}}{L^2}\right). \tag{1.81}$$

Quando se aplica a transformada de Laplace na parte esquerda da equação (1.76) de um processo superdifusivo, o resultado será o seguinte:

$$\mathcal{L}\{T^{\alpha}(t)\} \;=\; s^{\alpha}\mathcal{L}\{T(t)\} - s^{\alpha-1}T(0) - s^{\alpha-2}T'(0). \tag{1.82}$$

Substituindo na equação (1.76) e isolando a transformada de Laplace de $T(t)$, obtêm-se:

$$\mathcal{L}\{T^{\alpha}(t)\} = \frac{s^{\alpha-2}T'(0)}{s^{\alpha}+D\lambda} \;+\; \frac{T(0)s^{\alpha-1}}{s^{\alpha}+D\lambda}. \tag{1.83}$$

Com o auxílio da transformada inversa e dos resultados do apêndice, se consegue a seguinte solução:

$$T(t) = f_nT(0)E_{\alpha,1}\Big(\frac{-Dn^2\pi^2t^{\alpha}}{L^2}\Big) + f_nT'(0)tE_{\alpha,2}\Big(\frac{-Dn^2\pi^2t^{\alpha}}{L^2}\Big) \tag{1.84}$$

Agora que já se tem os resultados desejados, se consegue a solução geral para a concentração:

$$C(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n cos\Big(\frac{n\pi x}{L}\Big) E_{\alpha,1}\left(\frac{-Dn^2\pi^2 t^\alpha}{L^2}\right) + \sum_{n=0}^{\infty} g_n cos\Big(\frac{n\pi x}{L}\Big) t E_{\alpha,2}\left(\frac{-Dn^2\pi^2 t^\alpha}{L^2}\right) \tag{1.85}$$

Utilizando agora a condição inicial, C(x,0) = c(x), pode-se encontrar os $g_n$'s a partir dos conhecimentos das séries de Fourier[1].

$$c(x) = C(x,0) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n cos(\frac{n\pi x}{L}). \tag{1.86}$$

Desse modo:

$$g_n = \frac{1}{L}\int_{-L}^{L} c(x)cos(\frac{n\pi x}{L})dx = \frac{2}{L}\int_{0}^{L} c(x)cos(\frac{n\pi x}{L})dx, \qquad n = 0,1,2,3... \tag{1.87}$$

Essa sim é uma resposta bem geral para este problema, sendo que a função da condição inicial irá sofrer uma extensão par em razão de ser composta apenas por cossenos.

A constante K que é aqui empregada é uma constante real igual a $\frac{D\pi^2}{L^2}$, a variável t inicia-se em 0, a constante C se refere a concentração inicial (T(0)) e a constante D se refere a variação da concentração inicialmente (T'(0)). Para a subdifusão, nossa concentração será analisada em x=0, aqui representada por y:

$$y(t) = C\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{n\alpha}(-1)^n K^{2n}}{\Gamma(n\alpha+1)}, \quad 0 < \alpha \leq 1. \tag{1.88}$$

Para a superdifusão:

$$y(t) = C\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{n\alpha}(-1)^n K^{2n}}{\Gamma(n\alpha+1)} + D\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{n\alpha+1}(-1)^n K^{2n}}{\Gamma(n\alpha+2)}, \quad (1 < \alpha \leq 2 \tag{1.89}$$

[1]Uma função qualquer pode de ser escrita como uma série de Fourier, somatório de senos e cossenos e mais uma constante, desde que esta seja periódica, seccionalmente contínua e derivável exceto nos pontos de descontinuidade. Funções desse tipo podem ser utilizadas como condição inicial deste tipo de problema.

## 1.7 Fluxo Neutrons X Cálculo Fracionário

As equações cinéticas fracionais da difusão são uma abordagem útil para a descrição da dinâmica do transporte em sistemas complexos, que são regidos por processo anômalos da Difusão e por padrões de relaxamento não-exponencial. A difusão anômala pode ser modelada pela equação diferencial fracionária, tanto no tempo como no espaço. Para o espaço, parte do uso de divergência fracionária que modifica a expressão da difusão anômala, em a lei de Fick modificada . A aplicação desta divergência fracionária é apresentada em a definição do fluxo de neutrons do reator nuclear. Quando se observa uma difusão anômala em escala de tempo, a modificação sugere o uso de equações cinéticas fracionadas. Os operadores de curvas fracionadas desempenharão talvez papel na teoria eletromagnética e Equações de Maxwell.[7]

O perfil ou a cinética podem descrever melhor a realidade complexa.

### 1.7.1 A Difusão de Neutrons

Os nêutrons movem-se em um reator em caminhos complicados em "zigzag"devido a colisões repetidas com o núcleo. Como conseqüência desse movimento, os nêutrons que estavam originalmente em uma parte de um reator e movendo-se em uma determinada direção com uma energia específica, aparecem mais tarde em outra parte do sistema, movendo-se em outra direção com alguma outra energia. Os nêutrons neste caso são ditos terem sido transportados da primeira região de energia para a segunda, e o estudo desse fenômeno é conhecido como teoria do transporte.

A teoria do transporte é relativamente simples em princípio, e uma equação exata que governa os fenômenos de transporte pode ser facilmente derivada. Isso é chamado de Equação de Boltzmann, ou a equação de transporte, e o estudo da teoria do transporte é essencialmente o estudo desta equação. Infelizmente, é muito mais fácil derivar a equação de Boltzmann do que resolvê-la. Sob certas condições, no entanto, a equação simplifica consideravelmente e pode ser tratada de forma bastante direta. Esta versão simplificada da teoria do transporte é chamada de teoria da difusão e é o assunto do presente trabalho . Embora os requisitos para a validade da teoria da difusão raramente sejam plenamente realizados em problemas práticos do reator, o uso deste método normalmente fornece uma boa aproximação à solução de transporte exata e, por sua simplicidade, é comumente usado em muitos problemas de design de reator.[9]

### 1.7.2 Conceito de Divergência Fracionária para Fluxo de Partículas

Devido à relativa simplicidade e uso generalizado, a base da teoria local é discutida primeiro. A teoria local faz uso de EDA (equação de difusão de advecção)

como:
$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla.(-vC + D\nabla C) \tag{1.90}$$
onde C é a concentração de soluto, e D e v são tensores locais de dispersão e velocidade, respectivamente. O EDA baseia-se na definição clássica de divergência de um campo vetorial. A divergência é definida como a proporção do fluxo total através de uma superfície fechada para o volume fechado pela superfície quando o volume encolhe em direção à zero) como

$$\nabla.J = \lim_{V\to 0} \frac{1}{V} \int_S J.n\, dS \tag{1.91}$$

onde J é vetor de fluxo, V é um volume arbitrário incluído na superfície S e n é um vetor unitário normal a superfície. Isto é válido apenas se o fluxo for de fato uma quantidade representada por um vetor "ponto"em relação à escala de observação (por exemplo, fluxo de calor em material homogêneo).

Então o limite existe e o operador reduz o produto de ponto familiar com o vetor gradiente $[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}]$. A dispersão de soluções representa um contra-exemplo, devido principalmente às flutuações de velocidade que surgem apenas quando um espaço de observação aumenta, invalidando assim o limite. O fluxo de soluto ocorre devido aos efeitos combinados da velocidade média (advecção) e da flutuação da velocidade (dispersão). Os fluxos dispersivos para um determinado volume são tipicamente calculados de alguma forma (volumétrico, estatístico) e aproximados pela primeira lei de Fick. Uma vez que a própria velocidade é uma função variável no espaço, à medida que o volume de controle diminui (como exige a divergência), as flutuações da velocidade e o fluxo dispersivo desaparecem. Portanto, a verdadeira divergência do fluxo de soluto macroscópico não poderá conter um termo dispersivo macroscópico.[9]

### 1.7.3 Equação Cinética Fracionária

As leis fundamentais da física são escritas como equações para a evolução do tempo de uma quantidade X(t) com $\frac{dX(t)}{dt} = -AX$, onde esta poderia ser a equação de Maxwell, a equação de Schrodinger, a lei de movimento de Newton ou as equações geodésicas. A solução matemática para o operador linear A é $X(t) = X(0)\exp(-At)$, colocando $\tau = A^{-1}$ a lei de relaxamento exponencial padrão é

$$X(t) = X(0)\exp\left(\frac{-t}{\tau}\right) \tag{1.92}$$

Sistemas complexos e investigações de suas propriedades estruturais e dinâmicas foram estabelecidos na agenda da física. Essas estruturas com variações são caracterizadas através de:

a)uma grande diversidade de unidades elementares;

b)fortes interações entre as unidades; e

c) uma evolução não previsível ou anômala ao longo do tempo.

Sistemas complexos e seu estudo desempenham um papel dominante nas ciências exatas e da vida, abrangendo uma riqueza de sistemas como óculos, cristais líquidos, polímeros, proteínas, biopolímeros ou mesmo ecossistemas. Em geral, a evolução temporal e dentro desses sistemas desvia-se das leis padrão correspondentes. Com o desenvolvimento de experimentos de maior resolução, esses desvios tornaram-se mais proeminentes. Pode-se ter um comportamento exponencial modelado como:

$$X(t) = X(0)\exp\left(-\left(\frac{t}{\tau}\right)^{\alpha}\right) \tag{1.93}$$

com $0 < \alpha < 1$, ou pode-se visualizar a lei do Poder assintótica como

$$X(t) = X(0)\left(1+\frac{t}{\tau}\right)^{-n}, \qquad com \quad n > 0 \tag{1.94}$$

Do mesmo modo, o processo de difusão em vários sistemas complexos geralmente não segue as estatísticas gaussianas e, portanto, a segunda lei de Fick não descreve o comportamento de transporte relacionado. Especialmente observa-se desvios da dependência linear do deslocamento quadrático médio:

$$\left\langle X^2(t)\right\rangle \approx K_1 t \tag{1.95}$$

que é característico do movimento browniano, e uma consequência tão direta do teorema central do limite e da natureza markoviana do processo estocástico subjacente. Em vez disso, a difusão anômala é encontrada em uma ampla diversidade de sistemas, sendo a sua marca registrada o crescimento não-linear do deslocamento quadrático médio ao longo do tempo, seguindo o Lei da Potência:

$$\left\langle X^2(t)\right\rangle \approx K_\alpha t^{\alpha} \tag{1.96}$$

o que é onipresente para diversos sistemas. Existe uma variedade de outros padrões, como a dependência do tempo logarítmico. O comportamento de difusão anômala manifestado em (1.91) está intimamente relacionado com a quebra do teorema do limite central, causado por distribuições amplas de cauda longa ou correlações de longo alcance. Essas amplas distribuições de saltos espaciais ou tempos de espera levam a uma forma de difusão não evolutiva do tempo, não gaussiana e possivelmente não-Markoviana, que se manifesta em fenômenos temporais não locais. Observe que

o coeficiente de unidade de difusão em (1.75) está tendo unidade $[K_\alpha] \equiv cm^2 s^{-\alpha}$, de acordo com o expoente de difusão anômala. Esse expoente se $0 < \alpha < 1$ define o transporte sub-difusivo, e define fenômenos super-difusivos para $1 < \alpha < 2$. Para $\alpha = 1$, o fenômeno de transporte é ordem inteira normal e Fickiano.

A equação cinética de ordem inteira padrão quando integrada dá o seguinte

$$X_i(t) - X_0 = -c \int_0^t X(t) = -c_0 D_t^{-1} X(t) \tag{1.97}$$

$D_t^{-1}$ é o operador integral padrão de Riemann-Liouville. O número de densidade da espécie i, $X_i = X_i(t)$ é uma função do tempo, e $X_i(t = 0) = X_0$ é o número densidade de espécies i no tempo t = 0. Se retirarmos o índice i em (1.76) e substituir $c$ por $c_\alpha$, então a solução da equação de difusão de ordem fracionária generalizada será:

$$X(t) - X_0 = -c^\alpha \int_0^t X(t) = -c^{-\alpha} D_t^{-1} X(t) \tag{1.98}$$

é,

$$X(t) = X_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^(k)(ct)^{k.\alpha}}{\Gamma(k.\alpha + 1)} \tag{1.99}$$

Pode ser escrita também de forma compacta, pelo uso da função Mittag-Leffler como:

$$X(t) = X_0 E_\alpha(-c^\alpha t^\alpha) \tag{1.100}$$

### 1.7.4 Descrição do Fluxo de Neutrons em Reatores Nucleares

O controle de um reator nuclear está intimamente ligado ao comportamento da população de nêutrons em seu núcleo, uma vez que são eles os responsáveis pelas fissões nucleares e, consequentemente, pela produção de energia. Sendo assim, é de fundamental importância o emprego de um modelo teórico capaz de descrever o comportamento físico desse sistema, como a Teoria de Difusão de Nêutrons.[8]

Nessa teoria é feito o balanço da população em função do tempo, do espaço e da energia, considerando as possíveis fontes de geração e de perda de nêutrons.

A descrição do balanço de neutrns no reator nuclear é definida pela teoria do transporte. As equações de transporte básicas são então aproximadas por várias equações diferenciais acopladas. Uma aproximação simplificada da representação do reator dada aos engenheiros é os conjuntos de equações de difusão de neutrons em grupos de energia múltipla ou grupo de energia única. Em todas essas equações de difusão, o termo de vazamento tem a lei de difusão de Fick, onde o fluxo de neutrons é assumido como uma quantidade pontual. Para uma maior representação do reator, várias dessas equações de difusão são formadas e modeladas por coeficientes de acoplamento região a região. A ciência da engenharia então prossegue

nestas aproximações para obter o modelo de função de transferência de reator e, em seguida, várias análises do sistema de controle são feitas. Para sistemas complexos, os modelos inteiros do reator podem não ser suficientes e, portanto, um modelo de ordem fracionada para obter perfil de fluxo ou cinética pode descrever melhor a realidade complexa. [7]

### 1.7.5 Equação Clássica Constitucional da Difusão de Neutrons

No sentido clássico, a equação constitutiva assume fluxo de nêutrons pontual, com $v$ como a velocidade média dos neutrons que atravessam uma área com $n$ neutrons por unidade volume como densidade de nêutrons. A quantidade de vetores que representam o fluxo de neutrons é definida pela letra $J$.

As equações seguintes irão elucidar as declarações clássicas.

$$\overrightarrow{J} = n\mathrm{v} \tag{1.101}$$

$$\phi = nv \tag{1.102}$$

$$\overrightarrow{J} = -D.\nabla\phi \tag{1.103}$$

Considere um volume fechado, a perda de neutrons da superfície fechada é dada como a integral de superfície da corrente de nêutrons, $J.\,dS$. A perda que ocorre no volume por absorção é dada pela seção de absorção e, em seguida, tomando integral de volume de $\sum_a \phi\, dV$. Essa perda total, quando equiparada ao termo fonte, dá a equação constitutiva clássica de difusão de neutrões, conforme descrito abaixo

$$\int_S J\, dS + \int_V \sum\nolimits_a \phi\, dV = \int_V S\, dV \tag{1.104}$$

A forma integral acima quando convertida em integral de volume é

$$\int_V (\nabla.J + \sum\nolimits_a \phi - S)\, dV = 0 \tag{1.105}$$

ou

$$\nabla.J + \sum\nolimits_a \phi - S = 0, \qquad \textit{para o equilbrio} \tag{1.106}$$

Usando a expressão de $\overrightarrow{J} = -D.\nabla\phi$, obtemos o seguinte

$$-D.\nabla^2\phi + \sum\nolimits_a \phi - S = 0 \tag{1.107}$$

estado estacionário, o (*Right Hand Side* ) RHS -lado direito- da equação constitutiva acima é zero, e se houver fluxo de mudança de tempo, então isso é colocado no RHS como

$$D.\nabla^2\phi - \sum\nolimits_a \phi + S = \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{v}\frac{d\phi}{dt} \tag{1.108}$$

onde:
$\sum_a$: é a seção transversal de absorção macroscópica $[cm^{-1}]$.
$n$: neutrons;
$S$: é a força da fonte;
$\phi$: é o fluxo de neutrons $[neutron.cm^{-2}.s^{-1}]$;
$\frac{\partial n}{\partial t}$: taxa de variação da densidade de neutrons $[neutron.cm^{-3}.s^{-1}]$
$D$: é o coeficiente de difusão [cm]

### 1.7.6 Discussão sobre Equações Constitucionais Clássicas

A equação constitutiva de difusão de neutrons clássica, conforme descrito, é baseada na divergência clássica da divergência de um campo vetorial. A divergência é definida como a proporção do fluxo total através de uma superfície fechada para o volume fechado pela superfície, quando o volume encolhe em direção a zero.

$$\nabla.J = \lim_{V \to 0} \frac{1}{V} \int_S J.n\, dS \tag{1.109}$$

Onde J é o vetor de fluxo, V é um volume arbitrário incluído na superfície S. O produto ponto do vetor J com a superfície dS é óbvio; isso é válido apenas se o fluxo é de fato uma quantidade de vetor "ponto"em relação à escala de observação. Difusão de neutrons serve como contra-exemplo; Isto se deve principalmente, as flutuações de velocidade (mesmo em constante energia / temperatura) que surgem apenas quando o espaço de observação cresce, invalidando o limite. Também os nêutrons não estão mais em meio homogêneo. Os fluxos dispersivos para um determinado volume são normalmente calculados de alguma forma (volumétrica, estatística) e são aproximados pela primeira lei de Fick, como obtivemos ao derivar a equação constitutiva clássica para a difusão de neutrões, $\overrightarrow{J} = -D.\nabla\phi$.

Um único nêutron em um meio de dispersão viaja em movimento em tons de ziguezague. Quando um grande número de neutrons são considerados, existe um "movimento geral"da região de maior concentração (densidade) para a região de menor densidade (fluxo de números). Em casos hipotéticos, a velocidade permanece inalterada após a dispersão. Então, idealmente, em um meio de dispersão homogêneo, o volume pode diminuir para zero ($\lim V \longrightarrow 0$), pois não haverá flutuações de velocidade. Apesar de considerar uma única fonte de energia, digamos neutrons térmicos, haverá flutuações de velocidade no ponto de medição, portanto, o fluxo não pode certamente ser denominado "quantidade pontual". À medida que o volume de controle diminui para zero, as flutuações de velocidade e o fluxo dispersivo desaparecem. Portanto, em um verdadeiro sentido, o teorema da divergência clássica descere os efeitos reais da homogeneidade macroscópica e as flutuações associadas à difusão de neutrões em um reator.

Devido ao limite na definição de divergência, o teorema clássico de divergência de Gauss descontra o efeito de um grande volume até que o fluxo dispersivo possa ser aproximado por uma quantidade pontual.[9]

A difusão ordinária começa a partir de duas equações. A primeira equação é a equação de continuidade:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x} \tag{1.110}$$

Esta é uma lei de conservação fundamental relacionada com a variação temporal da densidade numérica ao fluxo macroscópico de partículas J. A equação constitutiva é a lei de Fick, uma equação fenomenológica que relaciona o fluxo com o gradiente de densidade (concentração) do número, através do coeficiente de Fick:

$$J = -D\frac{\partial \phi}{\partial x} \tag{1.111}$$

### 1.7.7 Divergência Fracionária em Equações de Difusão de Neutrons

dispersão de neutrons através da superfície fechada, fechado por volume de controle finito, pode ser alterado para:

$$-D\frac{d^{\beta}\phi}{dx^{\beta}} = \frac{\partial^{\alpha}}{\partial x^{\alpha}}\left(-D\frac{d\phi}{dx}\right) \tag{1.112}$$

A expressão acima esta relacionada a primeira lei de Fick. Na qual $\beta$ está entre 1 e 2 e $\alpha$ está entre 0 e 1, números reais fracionários não inteiros. Nas formulações de divergência, o vetor

$$[\frac{\partial^{\alpha}}{\partial x^{\alpha}}; \frac{\partial^{\alpha}}{\partial y^{\alpha}}; \frac{\partial^{\alpha}}{\partial z^{\alpha}}] \longrightarrow \nabla^{\alpha} \tag{1.113}$$

em que $\nabla^{\alpha}$ é o operador de divergência fracionária, que atua no vetor de corrente de neutrons J.

A equação constitutiva na forma de divergência fracionária, pode assim ser escrita:

$$-D.\nabla^{\alpha}\phi + \sum\nolimits_{a}\phi - S = 0 \tag{1.114}$$

$$\nabla^{\alpha}(-D.\nabla\phi) + \sum\nolimits_{a}\phi - S = 0 \tag{1.115}$$

$$-D.\nabla^{\alpha+1}\phi + \sum\nolimits_{a}\phi - S = 0 \tag{1.116}$$

Convertendo para a forma unidimensional, para obter o perfil de fluxo de neutrons em um reator, ou perfil de fluxo de neutrons, perto de uma fonte em meio

de dispersão, analisaremos as soluções do formulário da seguinte forma:

$$D\frac{d^{1+\alpha}\phi}{dx^{1+\alpha}} - \sum\nolimits_a \phi + S = 0, ...0 < \alpha < 1 \tag{1.117}$$

$$D\frac{d^{\beta}\phi}{dx^{\beta}} - \sum\nolimits_a \phi + S = 0, ...1 < \beta < 2 \tag{1.118}$$

Pode-se interpretar a forma simplificada de $\nabla^{\alpha}.J$ como um operador de divergência fracionária aplicado ao termo de dispersão de Ficki.

### 1.7.8 Solução Clássica da Equação Constitucional de Difusão de Neutrons para Ordem Inteira

Este item servirá como uma revisão para a solução clássica simples da equação de difusão. Então, na próximo item, resolveremos a equação diferencial fracionada obtida. Isso demonstrará as variáveis espaciais em uma dimensão para simplificar.

$$D.\nabla^2\phi - \sum\nolimits_a \phi + S = \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{v}\frac{d\phi}{dt} \tag{1.119}$$

$$S = k_{\infty}\sum\nolimits_a \phi \tag{1.120}$$

$$D.\nabla^2\phi - (k_{\infty} - 1)\sum\nolimits_a \phi + S = \frac{1}{v}\frac{d\phi}{dt} \tag{1.121}$$

O termo de fluxo é variável no espaço e no tempo; a constante $k_{\infty}$ representa o fator de multiplicação infinito[10]. A lei de multiplicação do termo original governará S. O método da separação de variáveis, dará a seguinte solução, para o termo de fluxo

$$\phi(r,t) = \phi(r).\phi(t) \tag{1.122}$$

que pode ser substituído na equação constitutiva básica, e então surgirão as seguintes expressões:

$$\phi = \phi(r).e^{(-\Lambda t)} \tag{1.123}$$

$$D.\nabla^2\phi(r) - (k_{\infty} - 1)\sum\nolimits_a \phi(r) + S = \frac{-\Lambda}{v}\phi(r) \tag{1.124}$$

$\Lambda$ é positivo para estado sub-crítico, negativo para super crítico e zero para o reator de equilíbrio crítico. Substituimos a coordenada espacial $r$, por $x$ e com a substituição de B por encurvamento geométrico, seguimos a forma simples. A solução temporal é evitada por simplicidade.

$$B^2 = \frac{(K_{\infty} - 1)\sum_a + \frac{\Lambda}{v}}{D} \tag{1.125}$$

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + B^2.\phi(x) = 0 \tag{1.126}$$

O termo $B^2$ é conhecido por flambagem geométrica, pois este termo se relaciona com curvatura geométrica do perfil de fluxo de neutrons no espaço:

$$B^2 = -\frac{\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}}{\phi(x)} \tag{1.127}$$

quando este é igual à deformação de material, o reator está em equilíbrio crítico.

Aqui podemos aplicar o método de Laplace padrão com condições de contorno iniciais em $x = 0$ no ponto central da geometria do reator com fluxo constante, e nas paredes em $x = a$ com fluxo zero. A fórmula geral após aplicação da transformada de Laplace para a derivada da função é indicada abaixo e é aplicada para se ter uma forma polinomial

$$\mathcal{L}\{\phi(x)\} = \Phi(s) \tag{1.128}$$

$$s^2\Phi(s) - \sum_{k=0}^{1} s^k \frac{d^{2-k-1}\phi(x)}{dx^{2-k-1}}\bigg|_{x=0} + B^2\Phi(s) = 0 \tag{1.129}$$

$$s^2\Phi(s) - \frac{d\phi(x)}{dx}\bigg|_{x=0} - s\phi(x)\bigg|_{x=0} + B^2\Phi(s) = 0 \tag{1.130}$$

Como as condições iniciais $\frac{d\phi(x)}{dx}\bigg|_{x=0} = 0$ e $\phi(x)\bigg|_{x=0} = C$, temos:

$$s^2\Phi(s) + sC + B^2\Phi(s) = 0 \tag{1.131}$$

De onde obtemos

$$\Phi(s) = \frac{sC}{s^2 + B^2} \tag{1.132}$$

Aplicando a transformada inversa de Laplace, tem se:

$$\phi(x) = C\cos(Bx) \tag{1.133}$$

A solução para a equação de ordem de número inteiro clássica também é obtida da seguinte maneira:

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + B^2.\phi(x) = 0 \tag{1.134}$$

$$\phi(x) = a_1\cos(Bx) + a_2\sin(Bx) \tag{1.135}$$

Considerando a simetria:

$$\phi(x) = \phi(-x) \tag{1.136}$$

$$\phi(x) = a_1\cos(Bx) \tag{1.137}$$

Para avaliar B, a condição de fronteira(limite) para x = a (onde a distância é extrapolada) implica que o fluxo torna-se nulo. Assim

$$\phi(\pm a) = a_1 \cos(Ba) = 0. \tag{1.138}$$

Como $a_1$ não pode ser zero, $\cos(Ba) = 0$, segue que B pode ter valores iguais a $B_n = \frac{n\pi}{2a}$.

Assim

$$\phi_n(x) = C.\cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), \qquad (n = 1, 3, ...) \tag{1.139}$$

$$B_1^2 = \left[\frac{\pi}{2a}\right]^2 \tag{1.140}$$

Os outros termos de ordem superior são chamados de autovalores e seu termo de fluxo relacionado decai com o tempo; apenas o primeiro termo dominante governa o perfil de fluxo.

### 1.7.9 Solução da Divergência Fracionária baseada na Equação de Difusão de Neutrons ( para Ordem Fracionária)

Extendo o método acima, resolveremos a equação diferencial fracionária:

$$\frac{d^\beta \phi(x)}{dx^\beta} + B^2\phi(x) = 0, \qquad 1 < \beta < 2 \tag{1.141}$$

$$\mathcal{L}\{\left(\frac{d^\alpha f(x)}{dx^\alpha}\right)\} = s^\alpha F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^k \frac{d^{\alpha-k-1} f(x)}{d^{\alpha-k-1}}\Bigg|_{x=0} \tag{1.142}$$

$$s^\beta \Phi(s) - \frac{d^{\beta-1}\phi(x)}{dx^{\beta-1}}\Bigg|_{x=0} - \frac{d^{\beta-2}\phi(x)}{dx^{\beta-2}}\Bigg|_{x=0} + B^2\Phi(s) = 0 \tag{1.143}$$

A equação (1.142) expressa acima, trata-se da transformação de Laplace para a definição LHD da derivada de ordem fracionária. Nesta expressão, o segundo e o terceiro termo do lado esquerdo têm derivada fracionária do fluxo no ponto inicial, que é fisicamente difícil de definir, e realizar o mesmo por medidas experimentais é difícil nesta fase. Vamos tentar fazer uso da transformação de Laplace da definição do RHD de Caputo, conforme indicado abaixo:

$$\mathcal{L}\{\left(\frac{d^\alpha f(x)}{dx^\alpha}\right)\} = s^\alpha F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{\alpha-k-1} \frac{d^k f(x)}{d^k} f(x)\Bigg|_{x=0} \tag{1.144}$$

$$s^\beta \Phi(s) - s^{\beta-1}\phi(X)\Bigg|_{x=0} - s^{\beta-2}\frac{d\phi(x)}{dx}\Bigg|_{x=0} + B^2\Phi(s) = 0 \tag{1.145}$$

Nós relacionamos a expressão acima fisicamente com a condição inicial anterior tomando o segundo termo como C e terceiro termo como zero como feito no item anterior. Aqui, a derivada de ordem inteira vem como condição inicial, portanto, fisicamente realizável a partir de medidas e observações.

$$\Phi(s) = \frac{s^{\beta-1}C}{s^{\beta} + B^2} \tag{1.146}$$

$$\phi(x) = C\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{s^{\beta-1}C}{s^{\beta} + B^2}\right] \tag{1.147}$$

A solução da equação diferencial fracionária para a equação constitutiva de equilíbrio de neutrons, é expressa da seguinte forma, usando a transformada de Lapalace:

$$\mathcal{L}\{(E_{\alpha}(-\lambda t^{\alpha})\} = \frac{s^{\alpha-1}}{s^{\alpha} + \lambda} \tag{1.148}$$

De onde obtemos

$$\phi(x) = CE_{\beta}(-B^2x^{\beta}) = C\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-B^2x^{\beta})^k}{\Gamma(\beta k + 1)} \tag{1.149}$$

$$\phi(x) = C + C\frac{(-B^2x^{\beta})}{\Gamma(\beta + 1)} + C\frac{(-B^2x^{\beta})^2}{\Gamma(2\beta + 1)} + C\frac{(-B^2x^{\beta})^3}{\Gamma(3\beta + 1)} + C\frac{(-B^2x^{\beta})^4}{\Gamma(4\beta + 1)} + ... \tag{1.150}$$

As equações representadas acima representam o mapeamento de fluxo obtido pela solução de equações constitutivas de neutrons de ordem fracionária, que são obtidas pelo conceito de divergência fracionária. O gráfico da figura abaixo representa, o comportamento para fluxo quando variamos o valor de $x$ e de $k$ para $\beta = 1,5$ ;$\beta = 1,8$ e $\beta = 2,0$.

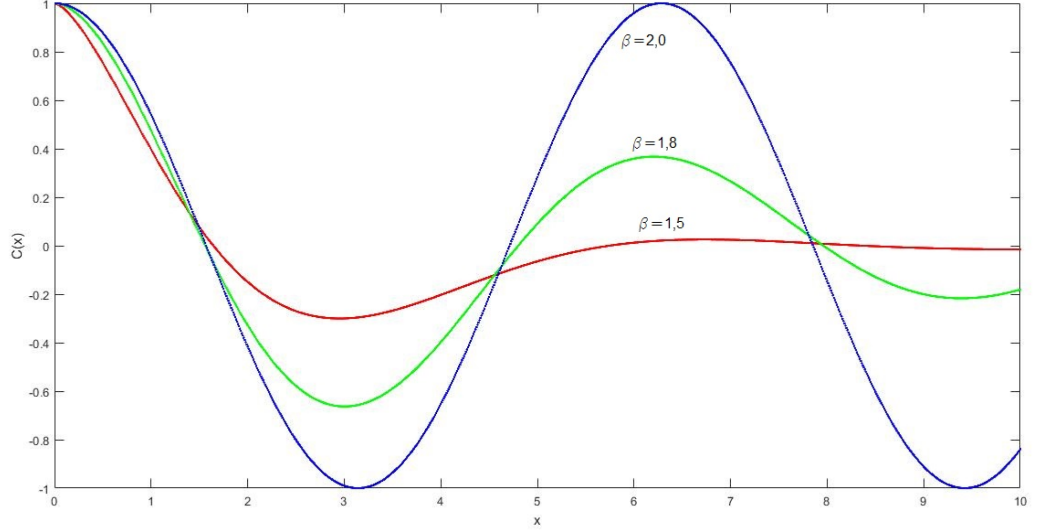



Figura 1.3: Mapeamento do fluxo de neutrons onde $C(x) = \phi(x)$

Observemos o padrão de fluxo clássico e o padrão de fluxo de ordem fracionária quando tomamos a ordem fracionária $\beta$ igual a 2. A solução na forma clássica relacionada com a função cosseno tem sua representação em série como:

$$\cos(x) = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + ... \tag{1.151}$$

$$\beta = 2, \quad \phi_{\beta=2}(x) = CE_\beta(-B^2x^2) = C\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-B^2x^2)^k}{\Gamma(2k+1)} \longrightarrow \tag{1.152}$$

$$\phi_{\beta=2}(x) = C\left[1 - \frac{(B^2x^2)}{\Gamma(3)} + \frac{(B^2x^2)^2}{\Gamma(5)} - \frac{(B^2x^2)^3}{\Gamma(7)} + ...\right] \tag{1.153}$$

como $\Gamma(n+1) = n!$, temos:

$$\phi_{\beta=2}(x) = C\left[1 - \frac{(B^2x^2)}{2!} + \frac{(B^2x^{2^2})}{4!} - \frac{(B^2x^2)^3}{6!} + ...\right] \approx C\cos(Bx) \tag{1.154}$$

Portanto, quando a ordem fracionária é igual a ordem inteira, obtemos o perfil de fluxo clássico. Isto é prova de nossa suposição de que, de fato, o fluxo de neutrons, não sendo uma quantidade pontual, pode ser representado como uma divergência fracionária de uma ordem menor que a unidade. Srivastava tentou ter funções trigonométricas realizadas pela função Mittag Leffler e usou as variantes da função Mittag-Leffler para resolver equações diferenciais fracionárias. O cosseno fracionário e as funções do seno fracionário são manifestações dessa importante função (Mittag-Leffler) no cálculo fracionário. Na solução analítica acima, demonstramos o uso de RHD para derivativos fracionários para nossa conveniência; No entanto, o LHD também é usado quando as condições iniciais das derivadas fracionárias são bem compreendidas e podem estar relacionadas à física. Atualmente, nossas ferramentas matemáticas vão muito além dos limites de nossa compreensão física. Assin sendo, qual a definição - RHD ou LHD - aplicável depende dos limites de nossa compreensão física. Por exemplo, nos estudos de polímeros, os modelos viscoelásticos tomam LHD e relacionam os derivados fracionários da variável de tensão com o estresse e obtêm soluções para o relaxamento do estresse. A extensão da pesquisa é necessária para obter informações sobre as condições iniciais baseadas em derivadas fracionadas e para atribuir significância física, quando a LHD é usada para solução; Atualmente, a teoria matemática vai muito além do nosso entendimento físico.

A Figura (1.3) dá vários valores para a ordem fracionada $\beta$. Os valores da função Gamma são obtidos a partir de uma calculadora padrão da função Gamma. Os valores utilizados são $\Gamma(2.5) = 1.32934$, $\Gamma(5.5) = 52.3427$ $\Gamma(2.8) = 1.6765$, $\Gamma(4.6) = 13.3813$, $\Gamma(6.4) = 240.8337$, $\Gamma(8.2) = 7562$

| x | $\beta=1.5$ | $\beta=1.8$ | $\beta=2.0$ |
|---|---|---|---|
| 0,0000 | 1,0000 | 1,0000 | 1,0000 |
| 0,3996 | 0,8257 | 0,9214 | 0,9238 |
| 0,7853 | 0,5510 | 0,6442 | 0,7071 |
| 1,1780 | 0,2744 | 0,3242 | 0,3820 |
| 1,5700 | 0,0000 | 0,0000 | 0,0000 |

Figura 1.4: Solução para equação constitutiva fracionária para várias ordens.

Por simplicidade e apenas para representação, B = 1, C = 1 são tomados e apenas quatro termos na série de soluções são considerados. O ponto x = 0 é o centro do reator e x = 1,57 é o limite extrapolado do reator nuclear no qual o fluxo é zero. A tabela mostra o fato de que quando a ordem fracionária tende para 2, a equação constitutiva dá uma distribuição do cosseno do perfil de fluxo.

### 1.7.10 Difusão de Neutrons em Medição Não-Multiplicativa em um reator.

Pense numa fonte de neutrons no plano mantida ao longo do eixo Y. A situação é semelhante a considerar um anteparo mantido na borda do reator (um meio de multiplicação). Anteriormente , o exemplo foi a difusão de neutrons na multiplicação de média de -a"para "+ a", e no reator aberto a distribuição de fluxo foi obtida. Asumiremos o fluxo de neutrons finito em x = 0 e zero em outro lugar. Também em x = 0, o fluxo de neutrons tem um gradiente finito (não nulo). A equação constitutiva de ordem inteira clássica, é expressa por:

$$D\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} - \sum\nolimits_a \phi(x) + S = \frac{1}{v}\frac{d\phi}{dt} \tag{1.155}$$

torna-se:

$$D\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} - \sum\nolimits_a \phi(x) = 0 \tag{1.156}$$

na falta de um termo de multiplicação de fonte; o último pode ser simplificado como:

$$D\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} - k^2\phi(x) = 0 \tag{1.157}$$

Usando a Transformada de Laplace, temos:

$$s^2\Phi(s) - \left.\frac{d\phi(x)}{dx}\right|_{x=0} - \left.s\phi(x)\right|_{x=0} + k^2\Phi(s) = 0 \tag{1.158}$$

Considerando:
$\left.\frac{d\phi(x)}{dx}\right|_{x=0} - \left.s\phi(x)\right|_{x=0} = -Ck; \quad \left.\phi(x)\right|_{x=0} = C$
Obtemos:

$$\Phi(s) = \frac{sC - kC}{s^2 - k^2} = \frac{sC}{s^2 - k^2} - \frac{kC}{s^2 - k^2} \tag{1.159}$$

Aplicando a transformada inversa de Laplace, obtemos:

$$\phi(x) = C\cosh(kx) + C\sinh(kx) = Ce^{-kx} \tag{1.160}$$

A solução é mostrada propositadamente para ter termos hiperbólicos. A solução com frações parciais teria dado a decomposição exponencial direta em relação à x. Isso é propositalmente mostrado para explicar o seguinte com as expressões constitutivas de divergência fracionada. A equação não local e suas transformações de Laplace na definição de Caputo, conforme feito anteriormente, produzem os seguintes resultados:

$$D\frac{d^\beta\phi(x)}{dx^\beta} - k^2\phi(x) = 0 \tag{1.161}$$

$$s^\beta\Phi(s) - \left.\frac{d\phi(x)}{dx}\right|_{x=0} - \left.s\phi(x)\right|_{x=0} + k^2\Phi(s) = 0 \tag{1.162}$$

Considerando:
$\left.\frac{d\phi(x)}{dx}\right|_{x=0} - \left.s\phi(x)\right|_{x=0} = -Ck; \quad \left.\phi(x)\right|_{x=0} = C$
Obtemos:

$$\Phi(s) = \frac{sC - kC}{s^2 - k^2} = \frac{sC}{s^\beta - k^2} - \frac{kC}{s^\beta - k^2} \tag{1.163}$$

$$\phi(x) = CR_{\beta,1}[k^2, x] + kCF_\beta[k^2, x] \tag{1.164}$$

Expandindo a forma compacta das funções R e F em notações em série, obtemos:

$$\phi(x) = C \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(k^2)^n x^{(n+1)\beta - 1}}{\Gamma(\{n+1\}\beta - 1)} + kC \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(k^2)^n x^{(n+1)\beta}}{\Gamma(\{n+1\}\beta)} \tag{1.165}$$

A equação clássica com ordem inteira foi resolvida mantendo a soma das funções hiperbólicas. Ambas as funções divergem e são ilimitadas para grandes distâncias da origem, mas o resultado final produziu um resultado convergente. Isto é exatamente o que é enfatisado para as duas soluções de série divergentes na forma de funções F e R, para a equação diferencial de ordem fracionada. A soma líquida deve chegar ao resultado da convergência. Essas funções generalizadas são traduzidas para expressões hiperbólicas, trigonométricas e outras expressões exponenciais para índices adequados.

## Conclusão

Aqui, assinalamos o uso da definição de divergência fracionária. Também foi discutido um método não local de obtenção da quantidade de fluxo de nêutrons a ser aplicado, pois argumenta-se que o fluxo de neutrons de ponto-quantidade clássico não reflete a realidade. O fluxo de neutrons não é uma quantidade pontual e, portanto, a definição de divergência fracionária dá a imagem real. Além disso, não só o método não local de obtenção de divergência dá efeito às flutuações da velocidade, mas também capta o efeito de proximidade real da presença de neutrons vizinhos. O conceito aqui apresentado requer experimentação e técnicas de regressão numérica para mapear o fluxo de neutrons na ordem fracionada. Além disso, a ordem fracionada será diferente de reator para reator devido à heterogeneidade, variando com as configurações do reator. Este método de perfil de fluxo visará o controle eficiente das usinas nucleares.

# REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] Notas de Aula-Biofisica 2-FFFCLRP-USP-Prof. Antonio Roque-Aula 1
[2] Hobbie, R.K., Intermediate Physics for Medicine and Biology, AIP Press, New York, 1997.
[3]Campos, B, Cálculo Fracionário aplicado à Engenharia Química. 2015.26f. Dissertação. Depart. Fisica. UFSJ.
[4]Salinas, Silvio R.A.2005 Salinas, Silvio R.A.. Einstein e a teoria do movimento browniano. Revista Brasileira de Ensino de Física (Impresso), São Paulo, v. 27, n.2, p. 263-269, 2005.
[5] CAMARGO,R.F.; OLIVEIRA,E.C. Cálculo Fracionário.1st Edd. Livraria da Física: São Paulo,2015.
[6]Matheus Dias de Carvalho ; OTTONI, J. E. . Introdução ao Cálculo Fracionário com aplicações. Revista de Matemática da Universidade Federal de Ouro Preto, 2018.
[7] Das. S., Functional Fractional Calculus for System Identification and Controls,Springer-Verlag, Berlin, 2008.
[8] COSTA, L.D., Solução da equação de difusão de nêutrons para o estudo da distribuição de potência em 3D, aplicado a reatores nucleares I Danilo Leite Costa. - Rio de Janeiro: CNEN/IEN, 2013.
[9]John R. Lamarsh, "Introduction to Nuclear Reactor Theory", Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1972.
[10] Jacob, Gerhard. A difusão de neutrons em meios moderadores e multiplicadores com uma fonte periódica de neutrons. Instituto de Energia Atômica - USP, 1960.